中国科学: 信息科学　2016 年　第 46 卷　第 10 期: 1442–1464
SCIENTIA SINICA Informationis
《中国科学》杂志社
SCIENCE CHINA PRESS
高性能科学计算若干前沿问题研究专刊

并行自适应有限元软件平台 PHG 及其应用

张林波*, 郑伟英, 卢本卓, 崔涛, 冷伟, 林灯

中国科学院数学与系统科学研究院科学与工程计算国家重点实验室 (LSEC), 北京 100190
* 通信作者. E-mail: zlb@lsec.cc.ac.cn

收稿日期: 2016–03–29; 接受日期: 2016–07–06; 网络出版日期: 2016–10–25
国家自然科学基金 (批准号: 91430215, 91530323, 11321061, 91530102, 21573274)、国家重点基础研究发展计划 (973 计划) (批准号: 2011CB309703)、国家高技术研究发展计划 (863 计划) (批准号: 2012AA01A30901)、国家磁约束聚变能发展研究专项 (批准号: 2015GB110003) 和中国科学院国家数学与交叉科学研究中心 (NCMIS) 资助项目

摘要　PHG (parallel hierarchical grid) 是一个由中国科学院 “科学与工程计算国家重点实验室” 研制的开源并行自适应有限元程序开发平台. 与国际上其他同类型软件相比, 其主要特征有: (1) 提供基于最新顶点单元二分的非结构协调四面体网格并行局部加密; (2) 支持 h-p 自适应有限元计算; (3) 支持大规模并行和动态负载平衡; (4) 提供大型稀疏线性方程组直接求解和灵活的预处理迭代求解. 本文介绍 PHG 平台的主要模块和核心算法, 以及基于 PHG 平台开发的一些并行有限元应用程序, 它们包括: 大型变压器铁损模拟、离子通道中的离子输运过程模拟、集成电路互连线寄生参数提取、冰盖模拟、弹性波 PML 方程谱元计算等.

关键词　有限元　自适应网格　并行计算　离子通道　电磁涡流　寄生参数提取　冰盖模拟　地震波模拟

1　引言

有限元方法是求解偏微分方程 (组) 的重要数值方法, 它通过将求解区域划分成由简单几何形状的单元构成的网格, 并在每个单元中用简单函数 (通常是多项式) 构成的基函数对解进行近似, 从而将偏微分方程 (组) 转化为代数方程组来实现数值求解. 在有限元方法中, 影响计算结果精度的主要因素是网格单元的分布和基函数. 自适应有限元方法最初由 Babuška 等提出 [1,2], 它提供了一套系统的方法, 在求解过程中自动根据数值解的性质反复对网格单元的分布及基函数进行调整, 从而逐步形成适合于所计算的问题的拟最优的网格. 以定常问题为例, 自适应有限元方法从一个初始网格出发, 通过反复循环求解得到最终的网格及其上的有限元解, 如算法 1 所示.

在关于自适应有限元方法的文献中, 通常将算法 1 中的 4 步循环简称为 “求解 – 估计 – 标注 – 加密” 循环 (solve–estimate–mark–refine loop). 其中, 对单元的加密可以采用不同方式进行, 包括: (1) 将单元划分成多个更小的单元 (h 自适应); (2) 在单元中使用更多的基函数, 例如提高基函数的阶数 (p 自适应); (3) 对不同单元同时或分别运用 (1) 和 (2) (h-p 自适应) [3]. 对于许多问题, 特别是解含有局

引用格式: 张林波, 郑伟英, 卢本卓, 等. 并行自适应有限元软件平台 PHG 及其应用. 中国科学: 信息科学, 2016, 46: 1442–1464, doi: 10.1360/N112016-00066

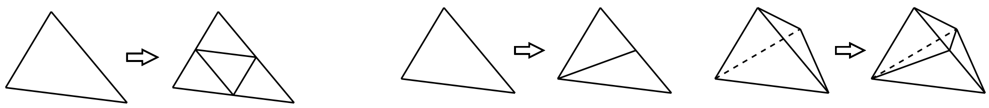
算法 1 求解定常问题的自适应循环

步骤 1: 在当前的网格上求解得到有限元解 (求解);

步骤 2: 计算有限元解的后验误差估计子, 如果误差达到精度要求则计算终止 (估计);

步骤 3: 根据后验误差估计子及特定的标注策略选择需要加密的单元 (标注);

步骤 4: 对选定的单元进行加密形成新的网格, 转向步骤 1 (加密).



(a) (b)

图 1 常用单元加密算法

Figure 1 Refinement of an element. (a) Regular refinement; (b) bisection refinement

部奇性的问题, 自适应有限元方法是求解它们的最有效的有限元方法之一. 因此, 自适应有限元方法的研究及应用近 20 多年以来一直是科学与工程计算的热门领域.

在自适应有限元方法的实现中, 一个核心算法是通过对单元的加密 (细分) 来实现网格局部加密. 单元加密算法要求保持单元的形状正则性, 即反复嵌套的加密不会产生退化的单元 (如单元的某些角趋向于 0 或 π). 对协调网格而言, 单元加密算法还要求保持网格的整体协调性. 常用的单元加密算法有两大类: 第一类称为正则加密, 它们将一个单元细分为 2^d 个全等的子单元, 其中 d 为空间维数, 参见图 1(a); 第二类称为二分加密, 主要针对单纯形单元 (二维为三角形, 三维为四面体) 构成的协调网格, 它们选择单元中一条边 (称为加密边), 将该边的中点 (称为新顶点) 依次与不在该边上的各顶点相连来将单元一分为二, 参见图 1(b). 正则加密算法能够自然保持单元的形状正则性, 而网格的整体协调性则需要通过对加密和非加密区域之间的一些过渡单元进行临时性的非正则加密来实现, 如红绿算法 (red-green algorithm) [4]. 而二分加密算法中, 网格的整体协调性则是通过适当多加密一些与需要加密的单元相邻的过渡单元来达成的.

二分加密算法能够同时兼顾自适应网格的整体协调性和粗细网格间的嵌套性, 可以大大方便自适应有限元算法的设计、分析和实现, 因而受到许多科研人员, 特别是从事自适应算法设计及其理论分析的科研人员的欢迎. 为了保证子单元的形状正则性, 二分加密算法中加密边的选择必须遵循一定的规则, 目前常用的规则有最长边二分加密 [5~7] 和最新顶点二分加密 [8~11].

在最长边二分加密算法中, 总是选取单元的最长边作为加密边, 由其产生的自适应网格的形状正则性对二维 (三角形网格) 情形可以从理论上严格证明, 而对三维 (四面体网格) 及更高维情形, 虽然大量的数值实验表明网格的形状正则性能够得到保持, 但其理论证明直到目前依然是一个公开问题.

在最新顶点二分加密算法中, 初始单元的加密边按照特定的规则产生, 而加密产生的新单元的加密边则选为与最新顶点相对的边. 对于三维及更高维数, 由于最新顶点的对边多于一条, 因此需要依据一套繁琐的规则来确定新单元的加密边. 与最长边二分加密算法不同, 最新顶点二分加密算法所产生的自适应网格的形状正则性有严格理论证明, 并且一些数值实验表明, 其所产生的自适应网格中为保持网格协调性而需要额外加密的单元数目通常要少得多 [9]. 对于一些特殊网格, 如完全由等腰直角三角形构成的网格并且初始网格中单元的加密边全部设定为单元的斜边, 则最新顶点与最长边二分加密是完全等效的. 事实上, 最新顶点二分加密中加密边的选取规则最初便是从一些特殊单元的最长边加密过程导出的 [8,9].

由于有限元计算通常采用非结构网格, 其局部加密算法的实现及自适应网格的管理非常复杂, 使得自适应有限元程序的编制具有很高的难度. 鉴于此, 国际上自 20 世纪 90 年代以来发展了一批自适应有限元软件平台或工具箱, 用于帮助科研人员及工程师编写自适应有限元程序. 一些公开发布的自适应有限元软件平台和工具箱包括: UG [12], deal.II [13], libMesh [14], FEniCS DOLFIN [15], ALBERTA [16], iFEM [17], PLTMG [18], 等等. 这些平台或工具箱中, 支持 MPI1) 并行的有 deal.II, libMesh 和 DOLFIN 等, 它们主要采用正则加密来进行网格局部加密. 个别平台, 如 DOLFIN, 提供了基于最长边二分加密的网格局部加密功能.

并行自适应有限元软件平台 PHG (parallel hierarchical grid)2) 由中国科学院科学与工程计算国家重点实验室研制. 不同于上述所介绍的其他自适应有限元平台, PHG 平台提供基于最新顶点二分加密的协调四面体网格自适应局部加密和 h-p 自适应, 并且支持大规模并行和动态负载平衡. 本文介绍 PHG 平台的主要功能模块和核心算法, 以及我们近年以来基于该平台发展的一些具备大规模并行计算能力的有限元应用程序.

本文剩余部分组织如下: 第 2 节介绍 PHG 平台的主要功能模块和核心算法; 第 3 节介绍大型变压器铁损模拟; 第 4 节介绍生物分子中的离子通道系统模拟; 第 5 节介绍集成电路寄生参数提取; 第 6 节介绍冰盖模拟; 第 7 节介绍弹性波 PML 谱元计算; 最后, 第 8 节给出总结和展望.

2 并行自适应有限元软件平台 PHG

PHG 平台的主体采用 C 语言编写, 基于 MPI 及 OpenMP3) 实现并行. PHG 平台提供面向对象方式的应用程序编程接口, 所实现的主要对象包括网格 (GRID)、有限元基函数 (DOF_TYPE)、自由度 (DOF)、映射 (MAP)、矩阵 (MAT)、向量 (VEC) 等. PHG 平台通过这些对象来封装自适应有限元计算的共性算法和代码, 包括并行实现、网格管理及有限元计算等, 隐藏实现细节, 方便用户调用.

PHG 平台的主体代码以开源的方式免费公开发布, 供科研和工程技术人员使用.

2.1 网格剖分、并行网格局部加密与动态负载平衡

PHG 平台的 MPI 并行基于网格剖分实现, 与其他并行有限元软件一样, 即将有限元网格剖分为与 MPI 进程相同数目的子网格, 每个进程负责存储、处理一个子网格. PHG 平台中的网格剖分基于单元进行, 它将全体单元的集合划分为 p 个 (p 小于或等于 MPI 进程数) 互不相交的子集, 每个子集构成一个子网格. 网格剖分算法要求能够尽量减少有限元计算中子网格间的通信. 常用的网格剖分算法有几何剖分算法如递归坐标对分 [19], 图剖分算法 [20,21]4), 以及基于 Hamilton 路径 [22,23] 和空间填充曲线 [24] 的算法, 等等. PHG 平台内部实现了几种基于 Hamilton 路径和空间填充曲线的网格剖分算法, 并提供了与专用网格剖分软件 ParMETIS 和 Zoltan [25] 的接口. PHG 平台的网格划分和并行实现对用户透明, 用户可以根据自己的算法特点方便地采用不同的网格剖分算法.

PHG 平台支持对任意协调四面体网格进行最新顶点二分局部加密. 当导入一个协调四面体网格时, PHG 平台根据特定的算法确定每个单元的加密类型和加密边, 加密产生的新单元的加密类型和加密边则按照特定的规则自动确定. 当用户需要进行网格局部加密时, 只需根据特定的自适应算法 (标

1) MPI forum. http://www.mpi-forum.org/.
2) The parallel adaptive finite element toolbox PHG. http://lsec.cc.ac.cn/phg/.
3) The OpenMP API specification for parallel programming. http://www.openmp.org/.
4) Family of graph and hypergraph partitioning software. http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/views/metis/parmetis/index.html.

注策略) 指定需要加密的单元和加密次数, 然后调用 PHG 平台提供的网格加密函数, 便可完成网格的局部加密. 对于并行网格, 即已经剖分, 分布到不同 MPI 进程中的网格, PHG 平台的网格局部加密也是并行进行的, 并且可以保证得到与串行网格一样的加密结果 [11].

PHG 平台还提供了完整的并行网格局部粗化功能 (unrefinement). 网格粗化是网格加密的逆向操作, 它是指将局部加密的单元还原成为未加密之前的单元. 网格局部粗化在一些问题, 如含时问题, 的自适应计算中是必需的. PHG 平台允许网格局部加密和局部粗化同时进行, 即对一部分单元进行局部加密, 而对另一部分单元进行局部粗化, 同时保证网格的整体协调性.

并行计算中, 负载平衡是影响并行效率的重要因素. 并行有限元计算中, 每个进程的负载取决于划分给该进程的单元数目. 自适应计算过程中, 网格局部的加密、粗化会改变各进程的负载从而造成负载的不平衡, 需要动态地调整子网格的分布来维持负载平衡, 这一过程称为动态负载平衡. PHG 平台提供透明的动态负载平衡功能, 用户只需调用平台提供的动态负载平衡函数, 便可自动完成网格重新划分、单元和用户数据的迁移以及新子网格重构 [26].

2.2　有限元计算与自适应

PHG 平台中提供了如下类型的有限元基函数:

(1) 任意阶结点型基函数, 也称为 Lagrange 型基函数, 它们张成的有限元空间是 H^1 协调的, 通常用于椭圆型问题的计算. 以 Lagrange 型基函数为基础, PHG 平台也提供对间断有限元 (Discontinuous Galerkin, DG) [27] 的支持.

(2) 任意阶层次基函数. 在层次基函数中, 低阶的基函数集合是高阶的基函数集合的子集, 用户可以在不同单元用不同阶的基函数来构造整体协调的有限元函数, 从而实现 h-p 自适应计算 [28]. PHG 平台所实现的层次基函数来源于文献 [29~31], 它们分别提供了 H^1, $\mathbf{H}(\mathrm{curl})$ 和 $\mathbf{H}(\mathrm{div})$ 空间的层次基函数.

(3) 谱元基函数. 谱元基函数, 也称集中质量 (mass lumping) 基函数, 在单元中是相互正交的, 从而它们产生的质量矩阵是对角的, 主要用于波动方程的计算 [32~34]. 对于三角单元的谱元基函数, PHG 平台提供了一个统一的实现框架, 可以方便地添加新的基函数. 三角形和四面体单元中的高阶谱元基函数的构造是一个非常困难的问题, 文献中已知的三角形和四面体网格上的高阶谱元基函数非常少. 我们曾以自己的一个寻找数值积分公式的程序 [35] 为基础, 开展过一些寻找、计算高阶谱元基函数的尝试, 并得到了一些三角形上的高阶谱元基函数 [36].

PHG 平台的数值积分模块提供任意精度的数值积分. 特别地, PHG 的源码中包含有大量三角形和四面体上的对称数值积分公式, 其中部分公式是我们通过计算找到的 [35]. 它们是有限元计算中的重要资源, 可供其他从事有限元程序开发者使用或参考.

为方便自适应有限元算法实现, PHG 平台对有限元函数对象提供了常用的代数和微分运算. 特别地, 为方便残量型后验误差估计子 [1] 的计算, PHG 平台提供了一个通用接口, 用于计算任意给定的向量或标量函数 $f(x)$ 的如下形式的面跳量的平方积分:

$$\int_F |[\![\mathcal{P}\,(f(x))]\!]_F|^2,$$

其中, F 代表单元面; $[\![\cdot]\!]_F$ 代表面 F 上的跳量; $\mathcal{P}(\cdot)$ 为用户指定的投影变换, 它可以是恒等变换, 与面法向的点乘 (法向投影) 或叉乘 (切向投影), 等等.

自适应有限元中的标注指基于后验误差估计子及其他已知数据, 根据特定的标注策略来选择需要加密的单元, 其中, 一些标注策略的并行实现是非平凡的. PHG 平台对当前使用的主要标注策略,

如最大策略 (max strategy)、误差等分布策略 (error equidistribution strategy)、保证误差下降策略 (guaranteed error reduction strategy, GERS) [37]、MNS 策略 (MNS-refinement strategy) [38] 等, 进行了统一的并行实现, 供用户直接调用 [39].

2.3 稀疏矩阵与线性求解器

PHG 平台包含一个线性代数模块, 提供对分布式向量和稀疏矩阵的管理、线性方程组的求解和特征值问题的求解.

PHG 平台中, 稀疏矩阵主要采用分布式的行压缩稀疏存储格式 (compressed sparse rows, CSR). 对于有限元离散产生的稀疏矩阵, 平台提供有限元自由度到向量分量的映射, 以及单元刚度矩阵到全局刚度矩阵的组装. 除此之外, 为方便使用及提高程序效率, PHG 平台还支持一种抽象形式的矩阵, 即 "无矩阵" 矩阵 (matrix-free matrix), 它通过调用用户指定的函数来完成矩阵乘以向量的运算, 可用于实现一些特殊矩阵的运算, 以及在 PHG 平台中封装第三方的矩阵格式和代码.

对于线性方程组求解, PHG 平台内部实现了几种常用的迭代方法, 包括共轭梯度法 (conjugate gradient, CG) [40] 和广义最小残量法 (generalized minimal residual, GMRES) [41] 等. 除此之外, PHG 平台还提供了与大量第三方开源线性求解器的接口, 包括 PETSc[5], HYPRE[6], Trilinos[7], MUMPS[8], SuperLU[9], 等等. 其中, PETSc, HYPRE 和 Trilinos 是分别由美国的几个国家实验室开发的大型开源线性求解器库, 其中集成了大量的迭代求解方法, 而 MUMPS 和 SuperLU 则采用了面向稀疏矩阵的直接消元求解方法. PHG 平台为其内置的求解器和部分第三方求解器 (如 PETSc) 提供了灵活的预条件接口, 用户可以方便地设置预条件过程. PHG 平台内部还实现了一些特殊的预条件子, 包括求解一般问题的限制型加性 Schwarz 预条件子 (restricted additive Schwarz preconditioner, RAS) [42] 和求解时谐 Maxwell 方程的 Hiptmair-Xu 预条件子 [43] 等.

对于特征值问题的求解, PHG 平台定义了一个统一的框架, 用于实现与不同第三方特征值求解器的接口. 目前, 基于该框架实现了接口的第三方特征值求解器包括: Trilinos 项目中的 ANASAZI 软件包[10], 基于 PETSc 的 SLEPc 软件包[11]、BLOPEX [44] 和 Parallel ARPACK [45], 等等. 用户可以根据所求解的问题的性质方便地选用不同的特征值求解器.

3 大型变压器铁损模拟

拟稳态 Maxwell 方程是计算电磁学的重要研究方向, 在电气工程领域具有广泛应用, 如大型变压器、电机等工程设备中的磁通和铁损模拟, 金属材料缺陷的无损探测, 随钻测井等 [46, 47]. Maxwell 方程组刻画了宏观电磁现象的本质规律, 可以描述电磁设备中电场、磁场和电流之间相互影响、相互转化的基本现象. 电气工程应用中, 激发电流一般为低频 (低于 1000 Hz), 位移电流密度远小于传导电流密度. 因此忽略位移电流, 得到拟稳态 Maxwell 方程

$$\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} + \mathrm{curl}\boldsymbol{E} = 0, \quad \mathrm{curl}\boldsymbol{H} = \boldsymbol{J} \qquad \text{in } \mathbb{R}^3, \tag{1}$$

5) Portable, extensible toolkit for scientific computation. http://www.mcs.anl.gov/petsc/.
6) Livermore's HYPRE library of linear solvers. http://computation.llnl.gov/project/linear_solvers/index.php.
7) Trilinos home page. https://trilinos.org/.
8) MUMPS: a parallel sparse direct solver. http://mumps.enseeiht.fr/.
9) SuperLU Website. http://crd-legacy.lbl.gov/ xiaoye/SuperLU/.
10) Anasazi: a block eigensolvers package. http://www.trilinos.org/docs/r10.6/packages/anasazi/doc/html/index.html.
11) SLEPc—scalable library for eigenvalue problem computations. http://slepc.upv.es/.

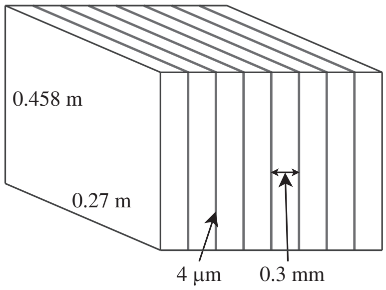


图 2 多层硅钢片 Ω_i, $1\leqslant i\leqslant M$, 叠放示意图

Figure 2 Geometric illustration of silicon steel laminations Ω_i, $1 \leqslant i \leqslant M$

其中 $\boldsymbol{B}$ 为磁通量密度, $\boldsymbol{H}$ 为磁场强度, $\boldsymbol{E}$ 为电场强度. 令 $\Omega_{\rm c}$ 为导体区域, 则电流密度 $\boldsymbol{J}$ 定义为

$$\boldsymbol{J} = \sigma \boldsymbol{E} \quad \text{in } \Omega_{\rm c}, \qquad \boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}_{\rm s} \quad \text{in } \mathbb{R}^3 \backslash \bar{\Omega}_{\rm c}, \tag{2}$$

其中 $\sigma \geqslant 0$ 为电导率, $\boldsymbol{J}_{\rm s}$ 为线圈中的激发电流密度. 对于各向异性的磁性材料, $\boldsymbol{B} = (B_1, B_2, B_3)$ 与 $\boldsymbol{H} = (H_1, H_2, H_3)$ 之间的非线性关系具有形式 $B_i = B_i(H_i)$, $i = 1, 2, 3$. Ammari 等于 2000 年严格证明 [48], 问题 (1) 的解关于频率二阶收敛于原 Maxwell 方程组的精确解.

取向硅钢片在工程电力设备的制造中有广泛应用, 大型变压器的铁芯和油箱磁屏蔽通常由多层硅钢片迭加而成. 关于有限元和 Maxwell 方程的数值方法已有大量研究工作 [49~55]. 硅钢片具有多尺度结构, 其长宽的特征尺寸为米, 厚度通常只有 0.18~0.35 mm, 而每张硅钢片外覆绝缘漆膜的厚度为 2~5 μm (图 2). 模拟硅钢片内部的三维涡流密度, 传统数值方法需要对硅钢片和绝缘漆膜进行网格剖分, 这将产生数目巨大且质量很差的单元, 在实际计算中是不可行的. 本文介绍一种 Maxwell 方程的简化建模 [56, 57] 和基于 PHG 平台开发的变压器模拟程序, 近似模型可以保持电荷的守恒性且避免在绝缘漆膜内进行网格剖分, 这极大地减少了计算量. 关于变压器模拟的相关研究还可以参考文献 [58~60].

3.1 硅钢片结构涡流问题的 $\boldsymbol{A}$-ϕ 公式

设 Ω 为一个截断区域且包含所有导体和线圈. 利用方程 (1) 和磁向量势 $\boldsymbol{A}$ 可得如下初边值问题:

$$\sigma \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} + \mathrm{curl} \boldsymbol{H}(\mathrm{curl} \boldsymbol{A}) = \boldsymbol{J}_{\rm s} \quad \text{in } \Omega, \qquad \boldsymbol{A} \times \boldsymbol{n} = 0 \quad \text{on } \partial\Omega, \qquad \boldsymbol{A}(\cdot, 0) = 0 \quad \text{in } \Omega_{\rm c}, \tag{3}$$

其中 $\boldsymbol{H} = \boldsymbol{H}(\boldsymbol{B}) = \boldsymbol{H}(\mathrm{curl}\boldsymbol{A})$ 为磁通量密度的非线性函数. 令 $\Omega_1, \ldots, \Omega_M$ 为各硅钢片代表的传导区域, M 为硅钢片数目, 相邻两个导体间为 4 μm 厚的绝缘漆 (图 2). 电流密度 $\boldsymbol{J} = \sigma \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}$ 满足

$$\mathrm{div}\, \boldsymbol{J} = 0 \quad \text{in } \Omega_i \qquad \text{and} \qquad \boldsymbol{J} \cdot \boldsymbol{n} = 0 \quad \text{on } \partial\Omega_i, \qquad j = 1, 2, \ldots, M. \tag{4}$$

这表明电流无法流出每张硅钢片的边界, 从而电荷在硅钢片内守恒. 数值求解方程 (3) 所采用的数值格式必须准确刻画这一守恒性. 传统数值方法的处理方式是对绝缘漆膜进行网格剖分, 并在漆膜区域令 $\sigma = 0$. 如上文所言, 这将产生数目巨大且质量很差的网格单元以致无法计算.

为克服这个困难, 我们假设绝缘漆膜厚度为零. 此时硅钢片结构被看作一个整体导电区域且 $\sigma > 0$ 严格成立. 显然方程 (3) 无法表征硅钢片界面的存在, 电荷在每张硅钢片内的守恒性也无法通过绝缘漆膜来实现. 为此, 我们在偶数号导体内引入标量电势, 满足

$$\Delta \phi_i = \mathrm{div}\, \boldsymbol{A} \quad \text{in } \Omega_i, \qquad \frac{\partial \phi_i}{\partial \boldsymbol{n}} = -\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{n} \quad \text{on } \partial\Omega_i, \qquad i \text{ 为偶数}. \tag{5}$$

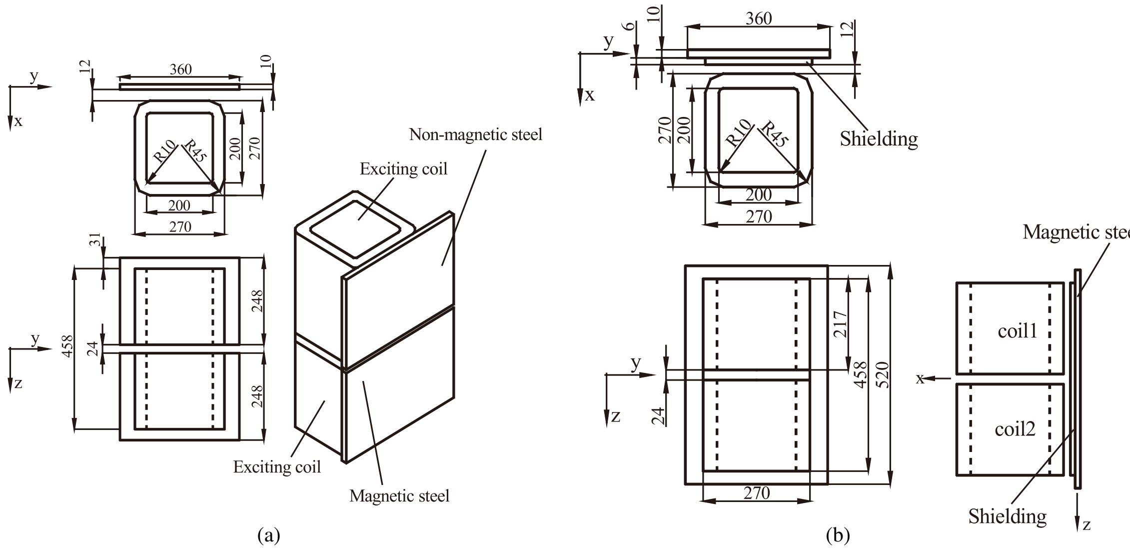


图 3　TEAM workshop 21 问题 [61]

Figure 3　TEAM workshop problem 21 [61]. (a) 21b; (b) 21c-M1

定义 $\phi \in L^2(\Omega)$ 如下:

$$\phi = \begin{cases} \phi_i & \text{in } \Omega_i, \ i \text{ 为偶数}, \\ 0 & \text{其他地方}, \end{cases} \qquad \tilde{\nabla}\phi = \begin{cases} \nabla\phi_i & \text{in } \Omega_i, \ i \text{ 为偶数}, \\ 0 & \text{其他地方}. \end{cases}$$

我们提出问题 (3) 的近似模型如下:

$$\sigma \frac{\partial}{\partial t}\left(\boldsymbol{A} + \tilde{\nabla}\phi\right) + \mathrm{curl}\boldsymbol{H}\left(\mu^{-1}\mathrm{curl}\boldsymbol{A}\right) = \boldsymbol{J}_{\mathrm{s}} \quad \text{in } \Omega, \qquad \mathrm{div}(\boldsymbol{A} + \nabla\phi_i) = 0 \quad \text{in } \Omega_i, \tag{6a}$$

$$\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{n} = 0 \quad \text{on } \partial\Omega, \qquad (\boldsymbol{A} + \nabla\phi_i)\cdot\boldsymbol{n} = 0 \quad \text{on } \partial\Omega_i, \tag{6b}$$

$$\boldsymbol{A}(\cdot,0) = 0, \quad \phi(\cdot,0) = 0 \quad \text{in } \Omega_{\mathrm{c}}. \tag{6c}$$

定义近似电流密度为 $\tilde{\boldsymbol{J}} = \sigma \dfrac{\partial}{\partial t}(\boldsymbol{A} + \tilde{\nabla}\phi)$. 则由式 (5) 和 (6) 可知电流密度满足

$$\mathrm{div}\,\tilde{\boldsymbol{J}} = 0 \quad \text{in } \Omega_i \qquad \text{and} \qquad \tilde{\boldsymbol{J}}\cdot\boldsymbol{n} = 0 \quad \text{on } \partial\Omega_i,$$

从而电荷在每张硅钢片内仍然守恒.

3.2　数值实验

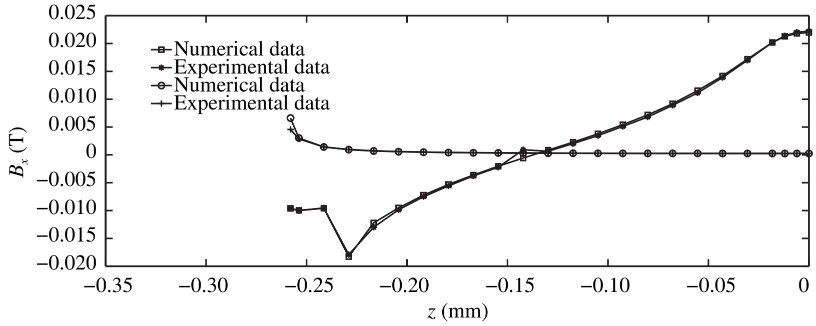
本部分的计算程序是基于有限元软件平台 PHG 开发的, 计算结果是在科学与工程计算国家重点实验室的浪潮天梭 10000 和国家超算天津中心的天河 1A 并行计算机上完成的.

算例 1　利用国际计算电磁学会的基准问题 TEAM Workshop Problem 21c-M1[61] 来验证近似式 (6) 的正确性. 剖分网格含 9 百万个四面体单元, 离散问题的总自由度数目为 1.28 亿, 共使用了 384 个 CPU 核. 该模型包含一张磁性钢板, 一张磁屏蔽板和两个载流线圈. 磁屏蔽板由 20 张取向硅钢片迭加而成, 两个载流线圈带有方向相反、电流强度为 3000 安培 • 匝、角频率为 50 Hz 的激发电流. 系统的几何尺寸见图 3(b).

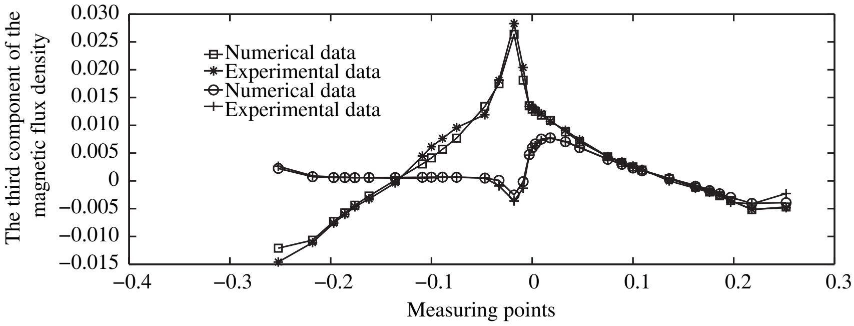
表 1　硅钢片和钢板内的铁损值 (W)

Table 1　Iron loss in the lamination stack and the steel plate

Measured value	Computed value		
3.72 [61]	3.73 (total loss)	2.789 (lamination stack)	0.941 (steel plate)



(a)



(b)

图 4　磁通量密度计算值和实验值的对比 [56]

Figure 4　Magnetic flux density: numerical values versus experimental values [56]. (a) Example 1; (b) example 2

表 1 显示了取向硅钢片和磁性钢板内铁损的计算值和实验值, 两者非常接近. 图 4 显示了磁通量密度在两组测量点上的计算值和实验值, 可以看出这两组曲线都吻合得很好. 这表明新模型 (6) 是原涡流问题 (3) 的高精度逼近.

算例 2　我们计算国际计算电磁学会的基准问题 TEAM Workshop Problem 21b [61], 目的是验证计算程序的弱可扩展性. 本算例是在国家超算天津中心的天河 1A 并行计算机上计算的. 模型的几何描述见图 3(a). 在 12288 个 CPU 核上, 进行了最大自由度数为 4.4 亿的并行计算. 表 2 显示程序的弱可扩展性在 70% 以上. 并且求解未知数规模为 4.4 亿的代数方程组只需要 11 分钟. 图 4(b) 显示, 磁通量密度的计算值与实验值吻合得很好.

4　生物分子中的离子通道系统模拟

离子通道是一种成孔蛋白, 它通过允许某种特定类型的离子依靠电化学梯度穿过该通道, 来帮助细胞建立和控制质膜间的微弱电压压差 [62]. 离子通道与生物体内的众多生命活动密切相关, 其结构和性质的研究在药物设计、疾病诊断等领域有着广泛的应用. 离子在离子通道中的输运过程和机制是分

表 2　TEAM workshop 21b 问题计算的并行弱可扩展性

Table 2　Weak parallel scalability in the computation of TEAM workshop problem 21b

CPU cores	DOF	Wall time (s)	Parallel efficiency (%)
768	29 M	501.0	100
1536	57 M	542.9	90
3072	110 M	556.4	85
6144	222 M	683.8	70
12288	443 M	665.9	71

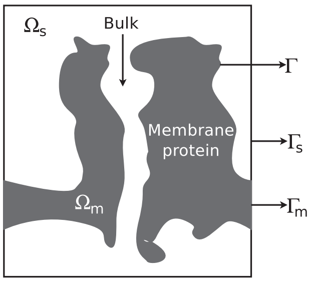


图 5　计算区域在 z 轴方向的一个 2 维切面. 白色部分为溶液和孔道区域, 其余为膜和蛋白区域

Figure 5　A 2D cut of the simulation box along the z axis. The white part is the solvent reservoirs and the channel region, the remaining part is the membrane and the protein region

子生物学的一类重要课题.

离子通道内的输运过程是一个多尺度多物理过程, 基于原子的分子动力学模拟一般很难观测到宏观可测的电压电流曲线. 连续模型具有方便跨越尺度研究的优点, 这里将描述采用 PNP (Poisson-Nernst-Planck) 连续模型来模拟离子在三维通道中的输运过程[63]. 另外, 生物分子的几何形状高度不规则, 我们采用自己开发的软件为膜和通道蛋白系统生成了表面 “贴体” 的网格[64], 这样就能准确、方便地利用基于 PHG 发展的有限元程序来求解通道系统的电扩散方程.

4.1　PNP 模型

PNP 理论是一个电扩散模型, 在化学、物理、生物等领域具有广泛的应用. 在离子通道中 PNP 模型可计算静电势、离子浓度分布、以及电流电压 (I-V) 曲线等.

PNP 模型结合了 Nernst-Planck 理论和 Poisson 理论, 其中 Nernst-Planck 理论描述了跨膜通道中离子的电扩散过程, Poisson 理论则描述了静电势, 静电势的梯度是引起离子运动的驱动力. 考虑一个开区域 $\Omega\in\mathbb{R}^3$, $\overline{\Omega}=\overline{\Omega}_{\rm m}\cup\overline{\Omega}_{\rm s}$, $\Omega_{\rm m}\cap\Omega_{\rm s}=\emptyset$, 其中 $\Omega_{\rm m}$ 表示蛋白质和膜区域, $\Omega_{\rm s}$ 表示溶剂和通道区域. 我们用 Γ 表示两个区域的交界面, 使得 $\overline{\Gamma}=\overline{\Omega}_{\rm m}\cap\overline{\Omega}_{\rm s}$, 其中 $\Gamma_{\rm m}$ 表示立方体模拟盒子上的膜边界. 图 5 是整个模拟系统沿着 z 轴方向的切面示意图.

PNP 方程组如下:

$$\frac{\partial c_i(x,t)}{\partial t}=-\nabla\cdot J_i=\nabla\cdot\{D_i(x)(\nabla c_i(x,t)+\beta q_i c_i(x,t)\nabla\phi(x))\},\quad x\in\Omega_{\rm s},\quad 1\leqslant i\leqslant N, \tag{7}$$

$$-\nabla\cdot(\epsilon(x)\nabla\phi(x))=\lambda(x)\sum_i q_i c_i(x,t)+\rho^f(x),\quad x\in\Omega, \tag{8}$$

其中 $c_i(x,t)$ 是第 i 种离子的浓度, 其带电量为 q_i. $D_i(x)$ 是与位置相关的扩散系数, $\phi(x)$ 是静电势. N 是系统中所考虑的扩散离子种类的数量. 常数 $\beta=1/(k_BT)$ 为 Boltzmann 能量的倒数, 其中 k_B 为

表 3　求解 PNP 方程的并行效率

Table 3　Parallel efficiency in solving the PNP equations

# processes	# iterations	Wall time (s)	Parallel efficiency (%)
8	11	3755.6	100.0
32	11	836.5	112.2
128	11	280.1	83.8
512	11	94.3	62.2
1024	11	76.4	38.4

Boltzmann 常数, T 是绝对温度. 我们假定介电系数是分片常数, 在 $\Omega_{\rm m}$ 中, 我们一般取 $\epsilon(x) = 2\epsilon_0$, 在 $\Omega_{\rm s}$ 中, $\epsilon(x) = 80\epsilon_0$, 其中 ϵ_0 是真空介电常数. 固定电荷分布 $\rho^f(x) = \sum_j q_j\delta(x - x_j)$ 是一组球心在 x_j 带电量为 q_j 的分子内部电荷分布的求和. 特征函数 $\lambda(x)$ 在 $\Omega_{\rm s}$ 中为 1, 在 $\Omega_{\rm m}$ 中为 0, 表示扩散离子只在溶剂区域.

在适当的边界和界面条件设置下, PNP 也可以模拟平衡态的情形, 使得到的结果电流处处为零, 离子的浓度分布满足 Boltzmann 分布, 事实上这时 PNP 方程组等价地退化为分子生物物理中常见的非线性 Poisson-Boltzmann 方程 [65]. 所以这一模型也可以用来模拟 PB 静电.

4.2　数值例子

这里的算例是在科学与工程计算国家重点实验室的浪潮天梭 10000 集群上完成的.

VDAC 是一类位于外线粒体的外膜蛋白离子通道. VDAC 为细胞质和线粒体之间的代谢产物和电解质提供了渗透途径. 其中一个亚型 VDAC1 的初始坐标取自于蛋白质数据库 (代码: 2JK4) [66]. VDAC1 的 PQR 文件包含了 4393 个原子. VDAC 离子通道的非结构化体网格和表面网格的一个例子可参看文献 [67] 中的图 5.

在非对称的 1.0:0.1 M 和 0.1:1.0 M 氯化钾溶液里, 分别通过布朗随机动力学 BD, PNP 和尺寸修正 PNP 模型 SMPNP [65] 模拟 VDAC1 得到的 I-V 曲线可参看文献 [63] 中的图 9. 另外, 计算所得的电导率在 -100 mV 时为 3.68 nS, 也接近实验值的范围 3.9~4.5 nS.

为了评估代码的并行效率, 我们生成了一个更大的网格系统, 包含 1523013 个顶点和 9149056 个四面体. 表 3 给出了使用不同进程数的运算时间和并行效率, 其中将最小进程数 8 的并行效率当做参考值 100%. 该算例得到的并行效率是令人满意的.

此外, 基于 PHG 的有限元程序也成功地模拟了一些其他离子通道的电流电压特性, 得到了合理的结果. 这一模型和软件可同样应用于类似或相近问题的研究中, 如酶与底物的扩散反应、纳米管和半导体中的输运等 [68]. 由于连续模型的近似, 一般来说对于一些孔径较小和柔性较大的通道蛋白, 以及在一些强带电、高电压、高浓度等的情况下, 就需要改进模型以得到更准确的描述.

5　集成电路寄生参数提取

随着 SoC (system-on-a-chip) 的工作频率进入数个 GHz, 芯片规模达到上亿晶体管, 芯片中包含十多层、总长数公里的互连线, 其结构复杂、规模庞大, 已取代器件成为决定系统芯片性能的主要因素. 为了获得期望的高速 SoC 系统性能, 必须解决互连线的建模、仿真和综合等关键难题. 纳米工艺尺度下集成电路互连线的建模、仿真、分析问题首先需要建立互连线的等效电路模型, 其中很重要的

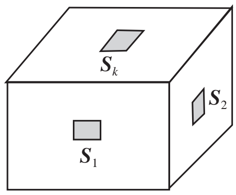


图 6 寄生阻抗参数提取求解区域 Ω. S_j, $j = 1,\ldots,N$, 为电极

Figure 6 The computational domain Ω. S_j, $j = 1,\ldots,N$, are the electrodes

一部分是提取互连线的寄生参数, 包括电容、电阻和电感等. 集成电路互连线日益复杂的结构及庞大的规模给寄生参数提取的数值计算带来了巨大的挑战, 单核处理器性能及已有算法和工具等 [69~72] 已无法满足精度和效率的需求. 随着并行处理时代的到来, 并行的互连线寄生参数提取方法显得尤为重要, 迫切需要一个高效的互连线寄生参数提取的并行工具.

基于 PHG 平台, 针对高频应用中复杂结构互连线寄生阻抗参数提取问题, 我们研制了并行自适应有限元寄生阻抗参数提取工具 ParAFEMImp12). 该工具是国内第一个可在数百乃至数万处理器核上运行的并行寄生参数提取工具, 它采用陈志明等提出的一个场与电路耦合的 $\boldsymbol{A}$-ϕ 模型及并行自适应有限元算法 [55]. 具体模型及算法如下.

记 Ω 为求解区域, $\Gamma = \partial\Omega$ 为区域边界. 区域 Ω 由导体区域 $\Omega_{\rm c}$ 和非导体区域 $\Omega_{\rm nc}$ 构成, $\Omega_{\rm nc} = \Omega\backslash\bar{\Omega}_{\rm c}$. $\Gamma_{\rm e} = \cup_{j=1}^{N} S_j$ 是一系列电极, 它们是导体边界和区域边界相交的部分, 即 $\Gamma_{\rm e} = \Gamma \cap \partial\Omega_{\rm c}$ (如图 6 所示). 导体由很多导线 D_i 构成, 导线间没有短接. 电极上有正弦变化的电压输入 (实际电路中会有导线将电极与电源相连). 选取任意 $H^1(\Omega)$ 的中函数 ϕ_0, 它在各个电极 S_j $(j = 1,\ldots,N)$ 上满足 $\phi_0 = U_j$, 其中 U_j 是电极上的电势. 记源电流为 $\boldsymbol{J}_{\rm s}$. 引入无量纲化因子 s 进行无量纲化处理后, 磁矢势 $\boldsymbol{A}$ 满足方程如下:

$$\begin{aligned} \nabla\times\nabla\times\boldsymbol{A} + {\rm i}s^2\sigma\mu\omega\boldsymbol{A} &= -s\sigma\mu\nabla\phi_0 + s^2\mu\boldsymbol{J}_{\rm s} \quad \text{in } \Omega, \\ \boldsymbol{A}\times\boldsymbol{n} &= 0, \quad \text{on } \Gamma. \end{aligned} \tag{9}$$

上述模型中, 由于在非导体区域 $\Omega_{\rm nc}$ 内 $\sigma = 0$, 导致方程的解在非导体区域不唯一. 但是, 对参数提取问题而言, 人们只关心导体区域的解, 必要时还可以通过消除数值解在非导体区域中的梯度分量来保证数值解在非导体区域的唯一性 [73].

ParAFEMImp 中采用自适应有限元方法求解方程 (9), 其中所采用的后验误差估计子由式 (10) 给出, 式中 $\boldsymbol{A}_h$ 为有限元解, 详见文献 [55].

$$\begin{aligned} \eta_T^2 = {} & h_T^2 \| s^2\mu\boldsymbol{J}_{\rm s} - s^2\sigma\mu(s^{-1}\nabla\phi_0 + {\rm i}\omega\boldsymbol{A}_h) \|_{L^2(T)}^2 \\ & + h_T^2 \| s^2\mu\sigma\nabla\cdot(s^{-1}\nabla\phi_0 + {\rm i}\omega\boldsymbol{A}_h) \|_{L^2(T)}^2 \\ & + \sum_{F\in\mathcal{F}, F\subset\partial T} h_F \| [\![\boldsymbol{n}\times\nabla\times\boldsymbol{A}_h]\!]_F \|_{L^2(F)}^2 \\ & + \sum_{F\in\mathcal{F}, F\subset\partial T} h_F \| [\![s^2\sigma\mu(s^{-1}\nabla\phi_0 + {\rm i}\omega\boldsymbol{A}_h)\cdot\boldsymbol{n}]\!]_F \|_{L^2(F)}^2. \end{aligned} \tag{10}$$

12) A parallel toolbox for 3D parasitic extraction of interconnects in integrated circuits. http://lsec.cc.ac.cn/tcui/ParAFEMIMP.tar.gz.

表 4　加法器电路算例强可扩展性测试

Table 4　Strong scalability test (the adder circuit, frequency $f = 1$ GHz)

CPU cores	Discretization time		Solution time		
	Wall time (s)	Efficiency (%)	# iterations	Wall time (s)	Efficiency (%)
768	33.6	100.0	18	548.4	100.0
1536	17.6	95.5	18	294.6	93.0
3072	9.1	92.3	15	126.5	90.3
6144	4.6	91.3	17	74.0	87.4
12288	2.4	87.5	16	56.8	53.6

在得到有限元解后, 电路的复阻抗的计算公式为

$$Z_j = R_j + \mathrm{i}\omega L_j = \frac{V}{I_j},$$

其中, V 是电极间的电势差即电压, 复电流 $I_j = \int_{S_j} \sigma(-\mathrm{i}\omega \boldsymbol{A}_h - s^{-1}\nabla\phi_0) \cdot \boldsymbol{n}\mathrm{d}s$.

基于上述方法的并行自适应阻抗参数提取算法的详细流程参见算法 2.

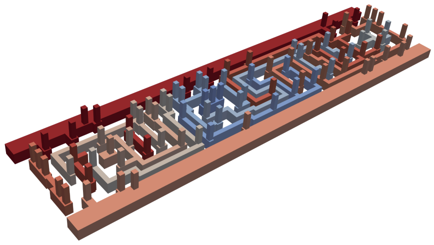
算法 2 并行自适应阻抗参数提取算法

输入: 电路版图 GDSII 文件, 电流频率 ω, 互连线数量 n, 磁导率 μ 和电导率 σ, 以及各个电极电势;

输出: 所有电极上复阻抗 Z;

```
由 0 号进程读入配置参数和 GDS 电路版图文件并自动生成四面体网格 M_h^0;
由 0 号进程将网格剖分成 P 个子网格并分发到对应的进程上, P 为进程数;
l ⇐ 0;
while true do
    执行负载均衡操作使得各个子网单元数尽可能相等;
    采用棱有限元对问题 (9) 进行离散;
    采用并行预条件 GMRES 迭代求解离散问题, 得到有限元解 A_h;
    计算每个单元 T ∈ M_h^l 的后验误差估计子 η_T 和总误差 η;
    if η 达到期望精度 then
        退出 while 循环;
    else
        根据指定的标注策略标注需要加密的单元;
        加密网格 M_h^l, 得到新网格 M_h^{l+1};
        l ⇐ l + 1;
    end if
end while
计算所有电极上的复电流 I 和复阻抗 Z;
```

相比已有的参数提取工具, ParAFEMImp 具有很高的并行效率和计算精度. 这里给出在国家超算天津中心的天河 1A 并行计算机上采用加法器电路算例对 ParAFEMImp 工具包进行的强可扩展性测试结果. 该算例的互连线路及离散网格参见图 7. 测试中固定自由度 (未知量) 数目为 107539144, 电流频率取为 $f = 1$ GHz. 计算中采用了 MPI+OpenMP 两层嵌套并行, 每个 MPI 进程中使用了 12 个 OpenMP 线程. 表 4 列出了使用不同处理器核数时方程求解和离散的时间. 使用 6144 处理器核时, 方程求解的并行效率可达到 84% 左右, 方程离散的并行效率为 91.3%; 而在使用 12288 处理器核时, 方程求解的并行效率依然有 54% 左右, 方程离散并行效率为 87.5%.


(a)

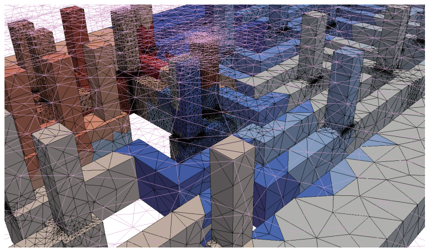

(b)

图 7 (网络版彩图) 加法器互连线路图 (a) 及网格图 (b)

Figure 7 (Color online) The adder circuit (a) and mesh (b)

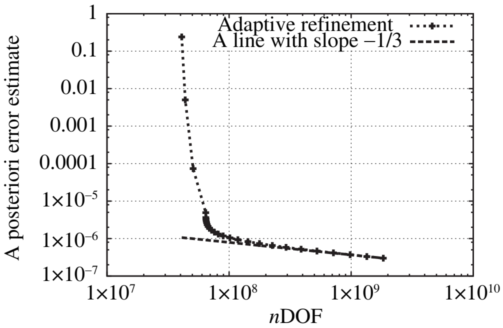


图 8 后验误差估计下降曲线 (加法器电路, 频率 $f=1$ GHz)

Figure 8 The *a posteriori* error estimate w.r.t. nDOF (the adder circuit, frequency $f = 1$ GHz)

图 8 是后验误差估计子随网格加密的下降曲线. 图中可以看到, 自适应加密使得后验误差下降阶达到了理论上的最优的估计, 即 1/3 阶 (算例中采用了第一类线性棱单元进行计算).

6 冰盖模拟

冰冻圈是地球系统中的基本圈层之一, 包括极地冰盖、冰架、冰川等. 冰冻圈与大气圈、海洋圈相互作用、相互影响, 决定了地球的气候. 目前, 冰盖、冰架和冰川的覆盖面积约为 1.6×10^7 km^2, 约占全球陆地总面积 11% [74], 其中南极冰盖面积约占 77% (1.23×10^7 km^2), 格陵兰冰盖约占 11% (0.17×10^7 km^2). 假如冰冻圈的冰全部融化, 全球海平面将上升约 64 m, 其中南极冰盖和北极格陵兰冰盖分别贡献约 56.6 m 和 7.3 m [75,76]. 政府间气候变化专门委员会 (IPCC) 2007 年的评估报告预测未来 100 年内海平面将上升 18~59 cm, 对近海岸地区的人类社会经济生活造成直接威胁. 研究冰盖本身的动力学特征有助于预测海平面变化, 加深理解冰盖 – 海洋 – 大气之间的相互作用过程, 具有重要的科学意义.

冰盖运动模型是由冰盖的动力学方程, 热力学方程和运动学方组成的. 冰盖的动力学模型可以用不可压粘性流体力学方程组描述, 由于该问题中流体的随体导数项可以忽略, 所以动力学方程简化为稳态的 Stokes 方程,

$$-\nabla\cdot\tau+\nabla p=\rho\boldsymbol{g}\quad \text{in }\Omega, \tag{11}$$

$$\nabla\cdot\boldsymbol{u}=0\quad \text{in }\Omega, \tag{12}$$

其中, $\boldsymbol{u}=(u_1,u_2,u_3)^{\mathrm{T}}$ 表示速度, τ 为偏应力张量, 而 $\boldsymbol{g}=(0,0,-\|\boldsymbol{g}\|)$ 表示重力加速度. 决定偏应力张量 τ_{ij} 和应变张量 $\dot{\varepsilon}_{ij}$ 关系的本构方程由 Glen 定律给出 [77,78]

$$\tau=2\eta_{\boldsymbol{u}}\dot{\varepsilon}_{\boldsymbol{u}}, \tag{13}$$

其中流变系数 $\eta_{\boldsymbol{u}}$ 是由温度和应变张量决定的. 冰盖顶部满足自由边界条件, 而冰盖底部的边界条件比较复杂, 可以采用不同的线性或者非线性的摩擦模型.

由于冰盖具有高宽比非常大的几何特征, 在生成冰盖的计算网格时, 我们一般选择先生成二维三角网格, 然后在竖直方向延伸, 按固定层数构造三棱柱网格, 最后把三棱柱拆散组成四面体网格. 对动力学的 Stokes 方程 (11) 和 (12), 采用数值稳定的 P_2/P_1 Taylor-Hood 有限元离散, 由于该方程组是非线性的, 使用 Picard 方法或者 Newton 方法进行迭代求解 [79], 每次迭代中求解一个线性方程组, 该方程组是一个系数变化很大的 Stokes 方程, 具有如下形式:

$$\begin{pmatrix} F & B^{\mathrm{T}} \\ B & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \boldsymbol{u} \\ p \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \boldsymbol{f} \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{14}$$

我们采用上三角块 $\begin{pmatrix} F & B^{\mathrm{T}} \\ 0 & -\hat{S} \end{pmatrix}$ 作为预条件子求解方程组 (14), 其中 $\hat{S}$ 是 Schur 补 $S=BF^{-1}B^{\mathrm{T}}$ 的近似, 由于该 Stokes 问题是变系数问题, 取 $\hat{S}$ 为加权的质量矩阵 [80~82], $\hat{S}_{ij}=\int_{\Omega}\eta_{\boldsymbol{u}}^{-1}\psi_i\psi_j\mathrm{d}\Omega$.

我们在 PHG 平台上实现了上述的分块矩阵预条件求解方法, 利用 PHG 平台方便的矩阵向量操作、丰富的线性求解器等, 构造了线性方程组 (14) 的高效的求解器. PHG 平台支持分块矩阵的操作, 在实现中可以先构造各个子块矩阵, 然后进行灵活的组合, 构造整体矩阵, 其中近似 Schur 补矩阵 $\hat{S}$ 的计算是使用 PHG 平台的有限元矩阵生成模块, 在计算网格上组装带权重的 P_1 有限元质量矩阵得到的. 线性方程组 (14) 的整体求解调用了 PHG 平台的预条件的 GMRES 迭代求解器, 其中采用了 PHG 平台的 Shell 预条件子接口来实现上三角块预条件子. 预条件过程是一个回代过程, 先求解 Schur 补近似的子问题得到压力解, 再将压力解代入求解速度子问题, 其中, Schur 补近似的子问题使用 PHG 的 PCG 求解器求解, 而速度子问题因其类似于变系数的 Poisson 方程, 我们通过 PHG 平台的外接解法器接口调用 HYPRE 的代数多重网格求解器 BoomerAMG 进行求解.

使用 ISMIP-HOM 实验 A 来测试上述预条件求解器的计算效果. 该实验中, 一片厚度均匀的长方形冰盖薄片坐落在倾斜的平面上, 冰盖的几何参数以及模型的各项参数参见文献 [83], 冰盖底部速度为零, 在四周边界满足周期边界条件. 计算网格是由结构网格生成的四面体网格, 在竖直方向上保持 20 层, 在水平方向上进行加密. 非线性迭代前 10 步采取 Picard 迭代, 之后使用 Newton 迭代. 数值结果见表 5. 由结果可见分块矩阵预条件子具有很好的预条件效果.

采用上述方法, 本文开发了基于 PHG 平台的冰盖模拟器, 并利用该模拟器开展了一些大区域的冰盖模拟. 这里简要介绍对整个格陵兰冰盖进行模拟得到的结果. 在格陵兰冰盖模拟中, 冰盖的几何信息和表面温度由 SeaRISE 项目给出, 参看文献 [79] 中的图 2(a). 冰盖的底部摩擦系数由长时间格陵兰冰盖模拟得出 [84], 参看文献 [79] 中的图 2(b). 计算网格是由二维非结构三角形网格叠加 10 层产生的四面体网格, 整体网格具有 730675 个顶点, 大约 390 万个四面体单元, 1700 万个自由度. 计算得到的速度场参看文献 [79] 中的图 2(c), 它与实际观测的速度大致吻合, 并且在快速冰流区域也能够吻合.

表 5　并行求解器弱可扩展性测试, ISMIP–HOM 实验 A [79]

Table 5　Weak parallel scalability test of the solver with ISMIP–HOM experiment A [79]

Grid size	DOF	# procs	# its (linear)	# its (nonlinear)	Time (s)	Efficiency (%)
20	208644	4	31	25	494	–
40	827604	16	26	25	466	106.0
80	3296724	64	20	25	435	113.6
160	13159764	256	19	25	525	94.1
320	52585044	1024	20	25	886	55.8

表 6　部分大规模地震波数值模拟软件

Table 6　Some software packages for large-scale seismic wave propagation simulations

Software package	Numerical method	Developer	Prize
SPECFEM3D	SE	Princeton Univ., CNRS, et al.	Gordon Bell Prize 03/Finalist 08
AWP-ODC	SG-FD	HPGeoC, SCEC	Gordon Bell Finalist 10
SeisSol	ADER-DG	LMU, TUM, Intel	Gordon Bell Finalist 14
GAMERA	FE	Univ. of Tokyo, RIKEN, et al.	Gordon Bell Finalist 14/Finalist 15
SPEED	DGSE	MOX, DICA	

7　区域尺度地震波并行谱元 PML 求解器

地震波数值模拟是天然地震学和地震勘探的重要基础, 在矿产资源探测、地震灾害预测、地球构造研究等领域有着广泛深入的应用. 地震波数值模拟由于波动本质需要消耗大量计算资源, 是并行计算的重要应用领域. 近年来, 随着地球物理科学研究不断深入以及超级计算机飞速发展, 一批优秀的大规模地震波数值模拟软件应运而生, 诸如 SPECFEM3D [85], AWP-ODC [86], SeisSol [87], GAMERA [88], SPEED [89] 等等, 如表 6 所示. 它们面向全球、区域及城市等不同尺度, 针对沉积平原、断裂等复杂地质条件, 构建粘弹性、非线性弹性、塑性等地震波模型, 采用交错网格有限差分 (SG-FD) [90]、有限元 (FE) [90]、谱元 (SE) [91]、任意高阶导数 – 间断有限元 (ADER-DG) [92]、间断谱元 (DGSE) [89] 等多种数值方法, 充分发挥了超级计算机的强大计算能力, 有效还原了地震波在真实条件下的传播行为. 当前, 地震波数值模拟正向更复杂的地震波模型、更真实的地质条件、更高的频率、更大的尺度、更深入的应用发展 [86~88], 给地震波数值模拟提出了更高的要求.

本文介绍我们基于 PHG 平台发展的一个高效可扩展的区域尺度地震波并行谱元求解器. 该求解器采用六面体非结构网格和谱元格式求解地震波 PML 方程 [93, 94], 其主要特点是采用了谱元离散中单元刚度矩阵的一种分解策略 [95], 从而显著降低了存储量和计算量, 有效提升了谱元格式的性能. 目前, 该求解器已经实现了支持 MPI+OpenMP 混合并行的纯 CPU 版本和多种异构加速版本 (包括 MIC, GPU 和国产众核加速器等). 在已完成的测试中, 并行程序可扩展到 98304 个 CPU 核 (并行效率 98.01%) 及 820800 个 MIC 核 (并行效率 85.50%).

7.1　地震波 PML 方程谱元格式

本文的并行谱元求解器已经可以计算 (粘) 声波和 (粘) 弹性波. 这里以无粘弹性波为例简要介绍主要的算法.

地震波在线性、无粘及理想弹性介质中传播遵从如下 1 阶时间系统 [96]:

$$\begin{cases} \rho\dot{\boldsymbol{v}} = \nabla\cdot\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{f}, \\ \dot{\boldsymbol{\sigma}} = \boldsymbol{C} : \nabla\boldsymbol{v}, \end{cases} \tag{15}$$

其中, $\boldsymbol{v}$, $\boldsymbol{\sigma}$, $\boldsymbol{f}$, ρ 和 $\boldsymbol{C}$ 分别为速度、应力、震源、密度和弹性张量.

在区域尺度地震波数值模拟中, 计算区域被截断成曲边四边形 (2 维) 或曲面六面体 (3 维). 区域顶部为自由边界, 附加零载荷边界条件. 区域底部及四周模拟无穷远边界, 附加无反射边界条件 [96]. 采用经典 PML 构建无反射边界条件, 可导出地震波 PML 方程如下 [93,94]:

$$\begin{cases} \rho\dot{v}_i = \nabla\cdot\boldsymbol{\sigma}_i + \boldsymbol{\sigma}_i^*\cdot\boldsymbol{e}, \\ \dot{\boldsymbol{Y}}_j + \boldsymbol{T}\boldsymbol{Y}_j = \nabla v_j, \\ \dot{\boldsymbol{\sigma}}_i + \boldsymbol{T}\boldsymbol{\sigma}_i = \sum_j \boldsymbol{A}_{ij}\dot{\boldsymbol{Y}}_j, \\ \dot{\boldsymbol{\sigma}}_i^* + \boldsymbol{T}\boldsymbol{\sigma}_i^* = \boldsymbol{T}'\boldsymbol{\sigma}_i, \end{cases} \tag{16}$$

这里, $\boldsymbol{A}_{ij} = [C_{ikjl}]_{k,l=1,\ldots,d}$, $\boldsymbol{Y}_j, \boldsymbol{\sigma}_i^*$ 为辅助变量, $\boldsymbol{T} = \mathrm{diag}\{\tau_1,\ldots,\tau_d\}, \boldsymbol{T}' = \mathrm{diag}\{\tau_1',\ldots,\tau_d'\}$, τ_i 为 PML 衰减项, $'$ 为导数算子. $\boldsymbol{e}$ 为分量全为 1 的向量, $i, j = 1,\ldots,d$, d 为空间维数.

在经典谱元离散框架 [91] 下, 适当选取速度场有限元空间及应力场有限元空间 [97], 对地震波 PML 方程进行谱元离散, 经过适当简化, 得到

$$\begin{cases} \boldsymbol{G}\dot{\boldsymbol{V}}_i = \sum_e [-\boldsymbol{R}_e\boldsymbol{\sigma}_i|_e + \boldsymbol{C}_e\boldsymbol{\sigma}_i^*|_e], \\ \dot{\boldsymbol{Y}}_j|_{e,\boldsymbol{p}} + \boldsymbol{T}|_{e,\boldsymbol{p}}\boldsymbol{Y}_j|_{e,\boldsymbol{p}} = (\boldsymbol{R}_e^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}_j|_e)|_{\boldsymbol{p}}, \\ \dot{\boldsymbol{\sigma}}_i|_{e,\boldsymbol{p}} + \boldsymbol{T}|_{e,\boldsymbol{p}}\boldsymbol{\sigma}_i|_{e,\boldsymbol{p}} = \sum_j \boldsymbol{A}_{ij}|_{e,\boldsymbol{p}}\dot{\boldsymbol{Y}}_j|_{e,\boldsymbol{p}}, \\ \dot{\boldsymbol{\sigma}}_i^*|_{e,\boldsymbol{p}} + \boldsymbol{T}|_{e,\boldsymbol{p}}\boldsymbol{\sigma}_i^*|_{e,\boldsymbol{p}} = \boldsymbol{T}'|_{e,\boldsymbol{p}}\boldsymbol{\sigma}_i|_{e,\boldsymbol{p}}, \end{cases} \tag{17}$$

其中, $\boldsymbol{V}_i$, $\boldsymbol{Y}_j$, $\boldsymbol{\sigma}_i$, $\boldsymbol{\sigma}_i^*$, $\boldsymbol{T}$, $\boldsymbol{T}'$, $\boldsymbol{A}_{ij}$ 为自由度, $\cdot|_{e,\boldsymbol{p}}$ 表示自由度限制在单元 e 插值点 $\boldsymbol{p}$ 上的值, $\cdot|_e$ 表示自由度限制在单元 e 上的值, $\cdot|_{\boldsymbol{p}}$ 表示自由度在单元上限制在插值点 $\boldsymbol{p}$ 上的值, $\sum_e\cdot$ 表示单元到全局组装. $\boldsymbol{G}$ 为全局质量矩阵, $\boldsymbol{R}_e$ 为单元刚度矩阵. 需要指出的是, 在经典谱元离散下, 全局质量矩阵 $\boldsymbol{G}$ 为对角矩阵. 这意味着, 谱元格式 (17) 结合显式时间离散格式 (如 Leapfrog 格式) 进行推进无需求解线性方程组.

7.2　单元刚度矩阵分解策略

谱元格式 (17) 的计算量与存储量高度集中于单元刚度矩阵 (转置) 与向量乘积 $\boldsymbol{R}_e\boldsymbol{\sigma}_i|_e$ 和 $\boldsymbol{R}_e^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}_j|_e$. 注意到单元刚度矩阵 $\boldsymbol{R}_e$ 具有如下矩阵分解:

$$\boldsymbol{R}_e^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{M}_e^{\mathrm{T}}\boldsymbol{K}^{\mathrm{T}}, \tag{18}$$

其中, $\boldsymbol{M}_e^{\mathrm{T}}$ 是块对角矩阵, 块大小为 d. $\boldsymbol{K}^{\mathrm{T}}$ 仅与参考单元有关, 被所有真实单元共享, 内存开销可以忽略不计, 并且其稀疏规律是完全清楚的. 由于 $\boldsymbol{R}_e^{\mathrm{T}}$ 的非零元素个数接近 $\boldsymbol{K}^{\mathrm{T}}$ 的 d 倍, 因此基于单元刚度矩阵的上述分解形式实现刚度矩阵乘向量操作相对于采用原始形式的单元刚度矩阵或全局刚度矩阵可以显著降低存储量和计算量. 表 7 给出了分别采用原始和分解形式的单元刚度矩阵以及采用文献 [94] 中的格式进行计算的存储量和计算量的统计、对比.

表 7　不同地震波 PML 方程谱元格式在 3 维非结构网格下的存储量和计算量比较 [95] a)

Table 7　Comparison on storage requirement and computational complexity of different schemes [95] a)

Numerical scheme	Storage requirement	Flops per time step
Undecomposed	$(9r+40)Pn_p^e+(9r+12)Pn_r^e+4N$	$3(36r+54)Pn_p^e+3(36r+18)Pn_r^e+6N$
Decomposed	$46Pn_p^e+18Pn_r^e+4N$	$3(12r+84)Pn_p^e+3(12r+48)Pn_r^e+6N$
Ref. [94]	$129Pn_p^e+72Pn_r^e+4N$	$3(12r+222)Pn_p^e+3(12r+69)Pn_r^e+6N$

a) r is the order of the spectral element, n_p^e is the number of elements in the PML layer, n_r^e is the number of non-PML elements, $P=(r+1)^3$, and N is the number of DOF of the velocity components ($N<P(n_p^e+n_r^e)$).

表 8　并行谱元求解器弱可扩展性测试: 纯 CPU a)

Table 8　Weak scalability test of the parallel spectral element solver: CPU only a)

# nodes	CPU cores	DOF	MPI		MPI+OpenMP	
			Wall time (s)	Efficiency (%)	Wall time (s)	Efficiency (%)
1	24	38242371	1.3264	100.00	2.3969	100.00
8	192	303960195	1.3228	100.27	2.3528	101.87
64	1536	2423791875	1.3206	100.44	2.4598	97.44
512	12288	19358827011	1.3276	99.91	2.5095	95.51
4096	98304	154744685571	1.3533	98.01	2.6744	89.62

a) 4 processes per node and 6 threads per process in the MPI+OpenMP tests.

表 9　并行谱元求解器弱可扩展性测试: CPU+MIC 异构并行 a)

Table 9　Weak scalability test of the parallel spectral element solver: CPU+MIC a)

# nodes	MIC cores	DOF	Wall time (s)	Efficiency (%)
1	171	38242371	1.9992	100.00
8	1368	303960195	2.0609	97.01
64	10944	2423791875	2.1123	94.65
512	87552	19358827011	2.2026	90.77
4096	700416	154744685571	2.2462	89.00
4800	820800	181335526659	2.3382	85.50

a) 3 processes per node, 1 MIC cards per process and 57×3 threads per MIC card.

7.3　并行实现与性能测试结果

基于六面体版本的并行自适应有限元软件平台 PHG 及前述算法, 我们研制了一个地震波 PML 方程的可扩展并行谱元求解器, 包括纯 CPU 版本和 CPU+ 异构加速版本. 求解器支持 MPI+OpenMP 混合并行, 异构加速版本支持 MIC 和 GPU 以及一些国产异构加速器. 由于计算格式本身良好的内在并行性以及经过精心设计的高效可扩展的并行数据结构和通信算法, 求解器具有良好的效率和并行可扩展性. 我们运用该求解器在国家超算广州中心的天河 2 号并行计算机上得到的部分弱可扩展性测试结果见表 8 和 9. 需要指出的是, 表中的用时测定的是时间推进所消耗的墙钟时间. 另外, 用时测定需要排除处理器的 warming up 干扰 [98]. 可以看到, 所有并行程序都具有良好的并行可扩展性.

8 总结和展望

经过 10 多年的研制, PHG 平台已经具备了支撑面向万亿 (10^{12}) 至十亿亿 (10^{17}) 次级超级计算机的并行有限元应用程序开发的能力. 基于 PHG 平台开发的并行有限元程序使用纯 CPU 核可有效地扩展到从数千进程、数万线程 (自适应程序) 到数万进程、数十万线程 (非自适应程序), 个别程序已经实现了百万核级别的异构众核加速.

当前, 高性能计算机正从十亿亿次级向 E 级 (10^{18}) 迈进, 并行规模越来越大, 体系结构日趋复杂. 与之相应地, 应用程序的最大并行规模可达到数万至数十万 MPI 进程, 并且需要有效地使用数百万乃至上千万异构处理器核对计算进行加速. E 级应用程序的发展面临着 "性能墙" 和 "编程墙" 这两大日益严重的瓶颈问题, 而发展面向特定算法或应用领域的软件平台或应用框架则是突破这两大瓶颈的可行途径. 这一形势给 PHG 平台的下一步发展提出了巨大的挑战, 也提供了新的机遇. 另外, 有限元应用的发展对 PHG 平台的功能也不断提出新的要求, 需要持续地对其进行扩展和完善.

为了适应高性能计算机体系结构的发展, 满足有限元应用程序研制中不断提出的新需求, PHG 平台的下一步发展拟将主要从两方面着手.

一方面, 我们将针对 E 级超级计算机的体系结构特征, 调整 PHG 平台的底层数据结构和核心算法, 提升其并行可扩展性, 增强其对异构众核加速的支持, 使其具备支撑开发 E 级并行有限元应用程序的能力. 例如, 目前 PHG 平台只能支持在数千 MPI 进程上有效地开展并行自适应计算, 其主要瓶颈在于网格并行自适应加密算法的可扩展性, 我们拟通过在 PHG 平台中引入多层子网格划分、设计多层并行网格局部加密算法来突破这一瓶颈. 再如, 如何针对使用数万乃至数十万进程的自适应有限元计算设计高效的通信算法亦是一个极具挑战性的研究课题.

另一方面, 我们将根据新的应用需求, 继续完善 PHG 平台的功能, 扩大其应用范围. 例如, PHG 平台中一些迄今为止较少用到的功能模块, 如网格粗化时高阶有限元函数的插值、跨网格有限元函数运算等, 其功能尚不完善, 性能和可扩展性亦有待提升. 再如, PHG 平台最早是针对传统并行有限元计算设计的, 在子网格间只提供公共面上的自由度数据交换, 这对于一些新型算法如间断有限元算法、有限体积算法、高阶重构等是远远不够的, 有待进一步扩展.

参考文献

1 Babuška I, Rheinboldt W C. *A posteriori* error estimates for the finite element method. Int J Numer Meth Eng, 1978, 11: 1592–1615

2 Babuška I, Rheinboldt W C. Adaptive approaches and reliability estimates in finite element analysis. Comput Meth Appl Mech Eng, 1979, 17/18: 519–540

3 Babuška I, Suri M. The *p* and *h-p* versions of the finite element method, basic principles and properties. SIAM Rev, 1994, 36: 578–632

4 Aksoylu B, Bond S, Holst M. An Odyssey into local refinement and multilevel preconditioning III: implementation and numerical experiments. SIAM J Sci Comput, 2003, 25: 478–498

5 Rivara M C. Mesh refinement processes based on the generalized bisection of simplices. SIAM J Numer Anal, 1984, 21: 604–613

6 Plaza A, Rivara M C. Mesh refinement based on the 8-tetrahedra longest-edge partition. In: Proceedings of the 12th International Meshing Roundtable, Sandia National Laboratories, Santa Fe, 2003. 67–78

7 Rivara M C, Pizarro D, Chrisochoides N. Parallel refinement of tetrahedral meshes using terminal-edge bisection algorithm. In: Proceedings of the 13th International Meshing Roundtable, Williamsbourg, 2004. 19–22

8 Kossaczky I. A recursive approach to local mesh refinement in two and three dimensions. J Comput Appl Math, 1994, 55: 275–288

9 Liu A, Joe B. Quality local refinement of tetrahedral meshes based on bisection. SIAM J Sci Comput, 1995, 16: 1269–1291

10 Arnold D N, Mukherjee A, Pouly L. Locally adapted tetrahedral meshes using bisection. SIAM J Sci Comput, 2000, 22: 431–448

11 Zhang L B. A parallel algorithm for adaptive local refinement of tetrahedral meshes using bisection. Numer Math Theory Meth Appl, 2009, 2: 65–89

12 Bastian P, Birken K, Johannsen K, et al. UG—A flexible software toolbox for solving partial differential equations. Comput Visual Sci, 1997, 1: 27–40

13 Bangerth W, Hartmann R, Kanschat G. deal.II—a general-purpose object-oriented finite element library. ACM Trans Math Softw, 2007, 33: 24

14 Kirk B S, Peterson J W, Stogner R H, et al. libMesh : a C++ library for parallel adaptive mesh refinement/coarsening simulations. Eng Comput, 2006, 22: 237–254

15 Logg A, Wells G N. DOLFIN: automated finite element computing. ACM Trans Math Softw, 2010, 37: 20

16 Schmidt A, Siebert K G. ALBERTA: an adaptive hierarchical finite element toolbox. http://www.alberta-fem.de/

17 Chen L. iFEM: an Integrated Finite Element Methods Package in MATLAB. Technical Report, University of California at Irvine. 2009

18 Bank E, Mittelmann H. PLTMG: a software package for solving elliptic partial differential equations. SIAM Rev, 1994, 36: 134–135

19 Berger M, Bokhari S. A partitioning strategy for nonuniform problems on multiprocessors. IEEE Trans Comput, 1989, C-36: 279–301

20 Chung F R K. Spectral Graph Theory. Providence: American Mathematical Society, 1997

21 Urschel J C, Xu J, Hu X, et al. A cascadic multigrid algorithm for computing the Fiedler vector of graph laplacians. J Comput Math, 2015, 33: 209–226

22 Liu H, Zhang L B. Existence and construction of Hamiltonian paths and cycles on conforming tetrahedral meshes. Int J Comput Math, 2011, 88: 1137–1143

23 Liu H, Chen Z X, Zhang L B. Parallel construction of Hamiltonian paths for conforming tetrahedral meshes. Int J Comput Math, 2013, 90: 1366–1372

24 Liu H, Leng W, Cui T. Development of encoding and decoding algorithms for high dimensional Hilbert curves. J Numer Meth Comput Appl, 2015, 36: 42–58 [刘辉, 冷伟, 崔涛. 高维 Hilbert 曲线的编码与解码算法设计. 数值计算与计算机应用, 2015, 36: 42–58]

25 Catalyurek U, Bozdag D, Teresco J, et al. Zoltan: parallel partitioning, load balancing and data-management services. http://www.cs.sandia.gov/Zoltan/

26 Liu H, Leng W, Cui T. Study of dynamic load balancing methods for parallel adaptive finite element computation. J Numer Meth Comput Appl, 2015, 36: 166–184 [刘辉, 冷伟, 崔涛. 并行自适应有限元计算中的负载平衡研究. 数值计算与计算机应用, 2015, 36: 166–184]

27 Cockburn B, Karniadakis G E, Shu C W. Discontinuous Galerkin methods: theory, computation and applications. In: Lecture Notes in Computational Science and Engineering. Berlin: Springer-Verlag, 2000. 11: 1119–1148

28 Liu H, Leng W, Cui T. A new *hp*-adaptive strategy for *hp*-adaptive finite element methods. J Numer Meth Comput Appl, 2015, 36: 100–112 [刘辉, 冷伟, 崔涛. *hp* 自适应有限元计算中一种新的自适应策略. 数值计算与计算机应用, 2015, 36: 100–112]

29 Ainsworth M, Coyle J. Hierarchic finite element bases on unstructured tetrahedral meshes. Int J Numer Meth Eng, 2003, 58: 2103–2130

30 Cai W, Wu J, Xin J. Divergence-free $\mathbf{H}$(div)-conforming hierarchical bases for magnetohydrodynamics (MHD). Commun Math Stat, 2013, 1: 19–35

31 Xin J, Guo N, Cai W. On the construction of well-conditioned hierarchical bases for tetrahedral $\mathbf{H}$(curl)-conforming Nédélec element. J Comput Math, 2011, 29: 526–542

32 Cohen G, Joly P, Roberts J E, et al. Higher order triangular finite elements with mass lumping for the wave equation. SIAM J Numer Anal, 2001, 38: 2047–2078

33 Chin-Joe-Kong M J S, Mulder W A, Veldhuizen M V. Higher-order triangular and tetrahedral finite elements with mass lumping for solving the wave equation. J Eng Math, 1999, 35: 405–426

34 Mulder W A. New triangular mass-lumped finite elements of degree six for wave propagation. Prog Electrom Res, 2013, 141: 671–692

35 Zhang L B, Cui T, Liu H. A set of symmetric quadrature rules on triangles and tetrahedra. J Comput Math, 2009, 27: 89–96

36 Ma S C. Numerical simulation framework for elastic wave with 3D unstructured Grid. Dissertation for Ph.D. Degree. Beijing: University of Chinese Academy of Sciences, 2015. 45–52 [马仕超. 三维非结构网格弹性波数值模拟支撑框架. 博士学位论文. 北京: 中国科学院大学, 2015. 45–52]

37 Dörfler W. A convergent adaptive algorithm for Poisson's equation. SIAM J Numer Anal, 1996, 33: 1106–1124

38 Morin P, Nochetto R H, Siebert K G. Convergence of adaptive finite element methods. SIAM Rev, 2002, 44: 631–658

39 Liu H, Zhang L B. Parallel implementation of commonly used marking strategies in the adaptive finite element toolbox PHG. J Numer Meth Comput Appl, 2009, 30: 315–320 [刘辉, 张林波. 自适应有限元常用标记策略及其在 PHG 中的并行实现. 数值计算与计算机应用, 2009, 30: 315–320]

40 Hestenes M R, Stiefel E. Methods of conjugate gradients for solving linear systems. J Res Natl Bureau Stan, 1952, 49: 409–436

41 Saad Y, Schultz M H. GMRES: a generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems. Soc Ind Appl Math, 1986, 7: 856–869

42 Cai X C, Sarkis M. A restricted additive Schwarz preconditioner for general sparse linear systems. SIAM J Sci Comput, 1999, 21: 792–797

43 Hiptmair R, Xu J. Nodal auxiliary space preconditioning in $\mathbf{H}$(curl) and $\mathbf{H}$(div) spaces. SIAM J Numer Anal, 2007, 45: 2483–2509

44 Knyazev A. Block locally optimal preconditioned eigenvalue xolvers. http://math.ucdenver.edu/aknyazev/software/BLOPEX/

45 Lehoucq R, Maschhoff K, Sorensen D, et al. The ARPACK home page. http://www.caam.rice.edu/software/ARPACK/

46 Cheng Z G, Norio T, Behzard F. Electromagnetic and Thermal Field Modeling and Application in Electrical Engineering. Beijing: Science Press, 2009 [程志光, 高桥则雄, 博扎德 · 弗甘尼. 电气工程电磁热场模拟与应用. 北京: 科学出版社, 2009]

47 Demkowicz L, Kurtz J, Pardo D, et al. Computing With *hp*-Adaptive Finite Elements (Frontiers: Three Dimensional Elliptic and Maxwell Problems with Applications). Boca Raton: Chapman & Hall/CRC, Taylor & Francis Group, 2008. 2

48 Ammari H, Buffa A, Nédélec J. A justification of eddy current model for the maxwell equations. SIAM J Appl Math, 2000, 60: 1805–1823

49 Beck R, Hiptmair R, Hoppe R, et al. Residual based *a posteriori* error estimators for eddy current computation. Math Model Numer Anal, 2000, 34: 159–182

50 Chen Z, Wang L, Zheng W. An adaptive multilevel method for time-harmonic Maxwell equations with singularities. SIAM J Sci Comput, 2007, 29: 118–138

51 Zheng W, Chen Z, Wang L. An adaptive finite element method for the H–Φ formulation of time-dependent eddy current problems. Numer Math, 2006, 103: 667–689

52 Hiptmair R, Xu J. Auxiliary space preconditioning for edge elements. IEEE Trans Magn, 2008, 44: 938–941

53 Yuan L, Hu Q Y. A planewave discontinuous Petrov-Galerkin method for Helmholtz equation and time-harmonic Maxwell equations with complexwave numbers. J Numer Meth Comput Appl, 2015, 36: 185–196 [袁龙, 胡齐芽. 复波数 Helmholtz 方程和时谐 Maxwell 方程组的平面波间断 Petrov-Galerkin 方法. 数值计算与计算机应用, 2015, 36: 185–196]

54 Wang P Z, Liu M F, Chen S C. Double set parameter cubic Morley element and anisotropic convergence. J Numer Meth Comput Appl, 2014, 35: 305–312 [王培珍, 刘鸣放, 陈绍春. 双参数长方体 Morley 元及其各向异性收敛性. 数值计算与计算机应用, 2014, 35: 305–312]

55 Chen Z M, Chen J Q, Cui T, et al. An adaptive finite element method for the eddy current model with circuit/field couplings. SIAM J Sci Comput, 2010, 2: 1020–1042

56 Jiang X, Zheng W. An efficient eddy current model for nonlinear Maxwell equations with laminated conductors. SIAM J Appl Math, 2012, 72: 1021–1040

57 Zheng W, Cheng Z. An inner-constrained separation technique for 3D finite element modeling of GO silicon steel laminations. IEEE Trans Magn, 2012, 48: 2277–2283
58 Zheng W Y, Chen X H. Subspace correction method for computing magnetic shields in large power transformers. IEEE Trans Magnetics, 2015, 51: 7002006
59 Jiang X, Zheng W. Homogenization of quasi-static Maxwell's equations. Multiscal Model Simulat SIAM Interdiscip J, 2014, 12: 152–180
60 Li P, Zheng W. An H-Φ formulation for the three-dimensional eddy current problem in laminated structures. J Differ Equations, 2013, 254: 3476–3500
61 Cheng Z G, Takahashi N, Forghani B. TEAM Problem 21 Family (V. 2009). Approved by the International Compumag Society Board at Compumag-2009, Florianópolis, Brazil. http://www.compumag.org/jsite/team.html
62 Hille B. Ion Channels of Excitable Membranes. 3rd ed. Sunderland: Sinauer, 2001
63 Tu B, Chen M X, Xie Y, et al. A parallel finite element simulator for ion transport through three-dimensional ion channel systems. J Comput Chem, 2013, 34: 2065–2078
64 Liu T T, Bai S Y, Tu B, et al. Mesh construction for membrane-channel protein system for finite element simulations. Mol Based Math Biol, 2015, 3: 2299–3266
65 Lu B Z, Zhou Y C. Poisson-Nernst-Planck equations for simulating biomolecular diffusion-reaction processes II: size effects on ionic distributions and diffusion-reaction rates. Biophys J, 2011, 100: 2475–2485
66 Bayrhuber M, Meins T, Habeck M, et al. Structure of the human voltage-dependent anion channel. Proc Natl Acad Sci USA, 2008, 105: 15370–15375
67 Tu B, Xie Y, Zhang L B, et al. Stabilized finite element methods to simulate the conductances of ion channels. Comput Phys Commun, 2015, 188: 131–139
68 Xu J J, Xie Y, Lu B Z. A parallel finite element solver for biomolecular simulations based on the toolbox PHG. J Numer Meth Comput Appl, 2016, 37: 67–82 [许竞劼, 谢妍, 卢本卓. 一个基于 PHG 平台的并行有限元生物分子模拟解法器. 数值计算与计算机应用, 2016, 37: 67–82]
69 Kamon M, Tsuk M J, White J K. FastHenry: a multipole accelerated 3-D inductance extraction program. IEEE Trans Microw Theory Tech, 1994, 42: 1750–1758
70 Zhu Z, Song B, White B. Algorithms in FastImp: a fast and wideband impedance extraction program for complicated 3-D geometries. IEEE Trans Comput-Aided Design Integr Circ Syst, 2005, 24: 981–998
71 Nabors K, White J. FastCap: a multipole accelerated 3-D capacitance extraction program. IEEE Trans Comput-Aided Design Integr Circ Syst, 1991, 10: 1447–1459
72 Ozgun O, Mittra R, Kuzuoglu M. CBFEM-MPI: a parallelized version of characteristic basis finite element method for extraction of 3-D interconnect capacitances. IEEE Trans Adv Pack, 2009, 32: 164–174
73 Sterz O. Multigrid for time-harmonic eddy currents without gauge. In: Scientific Computing in Electrical Engineering. Berlin: Springer, 2004. 382–389
74 Lemke P, Ren J, Alley R B, et al. Observations: changes in snow, ice and frozen ground. In: Climate Change 2007: the Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fourth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change. Cambridge: Cambridge University Press, 2007. 337–383
75 Lythe M B, Vaughan D G, the BEDMAP Group. Bedmap: a new ice thickness and subglacial topographic model of antarctica. J Geophys Res, 2001, 106: 11335–11351
76 Bamber J L, Layberry R L, Gogineni S P. A new ice thickness and bed data set for the Greenland ice sheet, 1. measurement, data reduction, and errors. J Geophys Res, 2001, 106: 33733–33780
77 Nye J F. The distribution of stress and velocity in glaciers and ice sheets. Proc Royal Soc London Ser A, 1957, 239: 113–133
78 Paterson W. The Physics of Glaciers. Oxford: Elsevier Science, 1994
79 Leng W, Ju L, Gunzburger M, et al. A parallel computational model for three-dimensional, thermo-mechanical stokes flow simulations of glaciers and ice sheets. Commun Comput Phys, 2014, 16: 1056–1080
80 Leng W, Ju L, Gunzburger M, et al. A parallel high-order accurate finite element nonlinear Stokes ice sheet model and benchmark experiments. J Geophys Res, 2012, 117: 1–24
81 Sokolov A, Olshanskii M A, Turek S. A discrete projection method for incompressible viscous flow with Coriolis force. Comput Meth Appl Mech Eng, 2008, 197: 4512–4520

82 Sokolov A, Turek S, Olshanskii M A. Numerical study of a new discrete projection method for rotating incompressible flows. Electron Trans Numer Anal, 2008, 32: 49–62

83 Pattyn F, Perichon L, Aschwanden A, et al. Benchmark experiments for higher-order and full-Stokes ice sheet models (ISMIP-HOM). Cryosphere, 2008, 2: 95–108

84 Shannon S R, Payne A J, Bartholomew I D, et al. Enhanced basal lubrication and contribution of the Greenland ice sheet to future sea-level rise. Proc Natl Academy Sci USA, 2013, 110: 14156–14161

85 Komatitsch D, Tsuboi S, Chen J, et al. A 14.6 billion degrees of freedom, 5 teraflops, 2.5 terabyte earthquake simulation on the Earth Simulator. In: Proceedings of the 2003 ACM/IEEE Conference on Supercomputing (SC'03). New York: ACM, 2003. 4–11

86 Cui Y, Poyraz E, Olsen K B, et al. Physics-based seismic hazard analysis on petascale heterogeneous supercomputers. In: Proceedings of the 2013 ACM/IEEE International Conference on High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC'13). New York: ACM, 2013. 1–12

87 Heinecke A, Breuer A, Rettenberger S, et al. Petascale high order dynamic rupture earthquake simulations on heterogeneous supercomputers. In: Proceedings of the ACM/IEEE International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC'14). Piscataway: IEEE Press, 2014. 3–14

88 Ichimura T, Fujita K, Quinay P E B, et al. Implicit nonlinear wave simulation with 1.08T DOF and 0.270T unstructured finite elements to enhance comprehensive earthquake simulation. In: Proceedings of the ACM/IEEE International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC'15). New York: ACM, 2015. 1–12

89 Mazzieri I, Stupazzini M, Guidotti R, et al. SPEED: spectral elements in elastodynamics with discontinuous Galerkin: a non-conforming approach for 3D multi-scale problems. Int J Numerical Meth Eng, 2013, 95: 991–1010

90 Moczo P, Kristek J, Galis M, et al. The finite-difference and finite-element modeling of seismic wave propagation and earthquake motion. Acta Phys Slovaca, 2007, 57: 177–406

91 Komatitsch D, Tromp J. Introduction to the spectral-element method for 3-D seismic wave propagation. Geophys J Int, 1999, 139: 806–822

92 Dumbser M, Käser M. An arbitrary high-order discontinuous Galerkin method for elastic waves on unstructured meshes-II. Three-dimensional isotropic case. Geophys J Int, 2006, 167: 319–336

93 Chew W C, Weedon W H. A 3D perfectly matched medium from modified Maxwell's equations with stretched coordinates. Microw Opt Tech Lett, 1994, 7: 599–604

94 Cohen G, Fauqueux S. Mixed spectral finite elements for the linear elasticity system in unbounded domains. SIAM J Sci Comput, 2005, 26: 864–884

95 Lin D, Cui T, Leng W, et al. An efficient parallel spectral element scheme for solving seismic wave equation. J Comput Res Dev, 2016, 53: 1147–1155 [林灯, 崔涛, 冷伟, 等. 一种求解地震波方程的高效并行谱元格式. 计算机研究与发展, 2016, 53: 1147–1155]

96 Fichtner A. Full Seismic Waveform Modelling and Inversion. Heidelberg: Spinger, 2010

97 Festa G, Vilotte J. The Newmark scheme as velocity-stress time-staggering: an efficient PML implementation for spectral element simulations of elastodynamics. Geophys J Int, 2005, 161: 789–812

98 Fang J, Sips H, Zhang L L, et al. Test-driving Intel Xeon Phi. In: Proceedings of the 5th ACM/SPEC International Conference on Performance Engineering (ICPE'14). New York: ACM, 2014. 137–148

The toolbox PHG and its applications

Linbo ZHANG*, Weiying ZHENG, Benzhuo LU, Tao CUI, Wei LENG & Deng LIN

State Key Laboratory of Scientific and Engineering Computing, Academy of Mathematics and Systems Science, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, *China*
*E-mail: zlb@lsec.cc.ac.cn

Abstract PHG (parallel hierarchical grid) is an open source toolbox, developed by the State Key Laboratory of Scientific and Engineering Computing at the Chinese Academy of Sciences, for writing parallel adaptive finite element programs. Among the many adaptive finite element toolboxes and software packages, PHG is characterized by the following features: 1) The ability to provide the most recent vertex bisection-based parallel local mesh refinement of unstructured conforming tetrahedral meshes. 2) It supports *h*-*p* adaptive finite element computations. 3) It incorporates massively parallel with transparent dynamical load balancing. 4) It provides flexible preconditioning and solutions of large sparse linear systems of equations. In this paper, the main modules and some core algorithms of PHG are described, and some parallel applications based on PHG, including the computation of iron-loss for large power transformers, simulation of ionic transport in ion channels, parasitic extraction of interconnects in integrated circuits, ice sheet simulation, and spectral element simulation of elastic waves with PML, are introduced.

Keywords finite element, adaptive grid, parallel computation, ion channels, eddy current, parasitic extraction, ice sheet simulation, seismic simulation

Linbo ZHANG was born in 1962. He received his Ph.D. degree in mathematics from Université de Paris-sud, France, in 1987. Currently, he is a professor of the Academy of Mathematics and Systems Science of Chinese Academy of Sciences, and the director of the State Key Laboratory of Scientific and Engineering Computing. His research interests include numerical algorithms and high performance computing.

Weiying ZHENG was born in 1973. He received his Ph.D. degree in computational mathematics from Peking University, China, in 2002. Currently, he is a professor of the Academy of Mathematics and Systems Science, Chinese Academy of Sciences. His research interests include numerical solutions of Maxwell's equations and magnetohydrodynamic equations.

Benzhuo LU was born in 1970. He received his Ph.D. degree in biochemistry and molecular biology from the University of Science and Technology of China, in 2002. Currently, he is a professor of the Academy of Mathematics and Systems Science of Chinese Academy of Sciences. His research interests include computational biology/chemistry, numerical methods, and application software.

Tao CUI was born in 1981. He received his Ph.D. degree in computational mathematics from the Academy of Mathematics and Systems Science of Chinese Academy of Sciences in 2010. Currently, he is an associate professor of the Academy of Mathematics and Systems Science of the Chinese Academy of Sciences. His research interests include high performance computing and computational electromagnetics.